

Loi de comportement en plasticité cristalline pour acier à basse température

G. Monnet^a, L. Vincent^b

a. EDF R&D, MMC, Avenue des Renardières, Ecuelles, 77818 Moret sur Loing cedex

b. CEA Saclay, DEN, SRMA, 91191 Gif sur Yvette cedex.

Résumé :

Dans le cadre de la prévision par une approche multiéchelles de l'évolution de la courbe de transition ductile/fragile des aciers de cuves des centrales nucléaires en fonction de l'irradiation, on commence par tenter de reproduire le comportement mécanique à basse température de ces matériaux à l'échelle de l'agrégat. Partant d'une analyse des résultats numériques obtenus par dynamique des dislocations discrètes dans ce régime de température, une nouvelle loi de comportement en plasticité cristalline est donc proposée avec un minimum de paramètres ajustables sur résultats macroscopiques.

Abstract :

The prediction of the irradiation-induced evolution of the ductile-fragile transition curve of pressure vessel steels is a major research topic in the nuclear industry. Multiscale approaches starting from ab-initio scale up to macroscopic continuum mechanics are currently investigated through the European project PERFORM60. At the intermediate level of cristal plasticity, several effects need to be described accurately before considering the introduction of irradiation hardening mechanisms, such as the thermal activity of dislocations slip, the different mobility between screw and edge dislocations at low temperature. These effects should be introduced in a cristal plasticity law used in Finite Element simulations of polycrystalline aggregates. Accordingly, a new cristal plasticity law is proposed in this paper based on a critical analysis of previous numerical results obtained with a Discrete Dislocations Dynamics code.

Mots clefs : cristal plasticity, dislocations, BCC

1 Introduction

Dans un contexte de prolongation de la durée de vie des centrales nucléaires existantes, on cherche à prévoir l'évolution sur le long terme de la fragilisation due à l'irradiation neutronique de l'acier constituant les cuves des réacteurs, un acier bainitique 16MND5 de structure cristallographique cubique centrée. Cette fragilisation se caractérise macroscopiquement par un décalage vers les hautes températures de la transition ductile-fragile de la courbe de ténacité. Ce décalage de transition s'explique en partie par le durcissement du matériau provoqué par l'introduction de défauts d'irradiation (cavités, boucles lacunaires ou interstitielles) qui s'opposent au glissement des dislocations. Les dommages d'irradiation produits à une échelle atomique ont ainsi des conséquences à l'échelle de la structure et une approche multiéchelles a ici tout son sens. Cette démarche est soutenue par un projet européen PERFORM60 [<http://www.perform60.net>] lequel implique un grand nombre de laboratoires de recherche.

Pour prévoir l'évolution du comportement mécanique des aciers de cuve en présence de défauts d'irradiation sur une large plage de température, il convient au préalable d'être capable de bien représenter le comportement du matériau à l'état non-irradié sur la même plage de température.

Cet objectif est ici poursuivi à l'échelle de la plasticité cristalline qui permet de remonter des informations sur le comportement mécanique d'un grain à l'échelle de celui d'un élément de volume des composants, l'élément de volume étant constitué d'un agrégat de grains. Plusieurs outils d'homogénéisation sont disponibles pour faire ce changement d'échelles, et on choisit ici un code de calcul aux éléments finis qui permet de prendre en compte explicitement les effets de voisinage entre grains. Le comportement mécanique de chaque grain

est décrit dans ce type de simulations à l'aide d'une loi de comportement autrement appelée loi de plasticité cristalline. Cette loi représente en fait le mouvement collectif des dislocations qui interagissent au sein d'un grain.

Les simulations de Dynamique des Dislocations (DD) ont justement pour ambition de représenter ce mouvement collectif des dislocations moyennant un choix fait sur la loi de mobilité des dislocations qui s'appuie sur une analyse fine de résultats expérimentaux et de simulations en dynamique moléculaire.

On propose dans cet article de tirer les enseignements de résultats de simulations numériques en DDD [1-2] pour écrire une nouvelle loi de plasticité cristalline pour matériaux cubique centré (BCC), dans le régime thermiquement activé. Le jeu d'équations constitutives de cette loi est présenté avant de l'appliquer au cas simple d'une traction sur une poutre monocristalline.

2 Loi de plasticité cristalline

Des observations expérimentales [3] et de récents travaux en DDD sur le comportement à basse température du fer [1-2] ont mis en évidence des propriétés importantes de la déformation plastique :

- La contrainte d'écoulement τ_{app} est indépendante de la mobilité des dislocations coins
- A température et vitesse constantes des dislocations vis v_{sc} , la cission effective sur un segment rectiligne de dislocation vis τ_{eff} dépend seulement de la longueur de ce segment l_{sc}
- Dans un régime stationnaire, la partie non-vis des dislocations est courbée et le rayon de courbure vaut $R = \mu b / \tau_{eff}$, où μ est le module de cisaillement et b la norme du vecteur de Burgers.
- Lorsque la longueur du segment vis rectiligne tend vers zéro, la dislocation vis se courbe et τ_{eff} augmente pour compenser la tension de ligne τ_l

Partant de ces remarques principales, il est possible de proposer des relations de comportement en plasticité cristalline.

Tout d'abord, si nous distinguons la contribution des dislocations vis et non vis (notées coin pour simplifier), la relation d'Orowan $\dot{\gamma}^s = \rho^s b v^s$ reliant la vitesse des dislocations mobiles au taux de glissement sur un système s fournit :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_{sc}^s b v_{sc}^s + \rho_e^s b v_e^s \quad (1)$$

Les indices haut font référence au système de glissement considéré alors que les indices bas précisent de quel type de dislocation il s'agit (sc : screw/vis, ed : edge/coin). A basse température dans le Fer CC, la densité des vis est largement supérieure à celle des coins, mais la vitesse des coins est largement supérieure à celle des vis. La contribution des coins ne peut donc pas être négligée. Pour les prendre en compte, nous considérons, comme suggéré par [4] et confirmé en DD par [5], que l'aire balayée par la section vis lors d'un vol entre deux obstacles est égale à celle balayée par la section non-vis, ce qui nous donne :

$$\dot{\gamma}^s = 2\rho_{sc}^s b v_{sc}^s \quad (2)$$

Comme la microstructure est essentiellement formée de dislocations vis, nous pouvons considérer que la densité des dislocations vis est égale à la densité totale des dislocations sur le système concerné, soit :

$$\dot{\gamma}^s = 2\rho^s b v_{sc}^s \quad (3)$$

Reprenant l'expression de la vitesse des vis proposée dans [2] et généralisant cette expression sous forme de sinus hyperbolique, nous obtenons alors :

$$\dot{\gamma}^s = 4b\rho^s H l_{sc}^s \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta G_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_o}}\right) \quad (4)$$

On note que le passage de l'exponentiel à un sinus hyperbolique induit la multiplication par un facteur 2. Par ailleurs, on remarque également que l'enthalpie libre ΔH_0 est remplacée par l'énergie d'activation ΔG_0 , l'entropie d'activation étant négligeable dans le fer.

Les paramètres H , ΔG_0 et τ_0 sont identifiés à partir de résultats expérimentaux [1]. k est la constante de Boltzmann et T la température absolue.

L'évolution de la densité de dislocations est décrite par l'équation différentielle suivante [6]:

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{\alpha \sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}}{K} - g_c \rho^s \right) \quad (5)$$

Avec α , K et g_c deux constantes dépendantes du matériau.

La longueur de segment vis l_{sc}^s est calculée comme une fonction de l'espacement moyen entre obstacles L^s : $l_{sc}^s = \max(l_c; L^s - 2\alpha R^s)$ où l_c est la longueur critique d'un double décrochement représentant la limite inférieure de l_{sc}^s . La distance moyenne entre obstacle s'écrit:

$$L^s = \frac{1}{\sqrt{\sum_{u \neq s} a^{su} \rho^u}} \quad (6)$$

Avec a^{su} les paramètres d'interaction que l'on peut calculer à l'aide de simulations DD. Le rayon de courbure R^s peut quant à lui s'écrire :

$$R^s = \frac{\mu b}{|\tau_{appl}^s| - \tau_{self}^s - \tau_F} \quad (7)$$

Avec τ_F un terme de friction de réseau et τ_{self}^s un terme d'auto écrouissage qui s'écrit : $\tau_{self}^s = \alpha_{auto} \mu b \sqrt{\rho^s}$.

La cisssion effective s'écrit enfin:

$$\tau_{eff}^s = |\tau_{app}^s| - (\tau_{self}^s + \tau_{LT}^s + \tau_F) \quad (8)$$

Avec τ_{LT}^s un terme de tension de ligne. Cette contribution reste nulle tant que la longueur de segment vis l_{sc}^s reste supérieure à la longueur critique l_c . Lorsque la température augmente ou que le niveau de déformation conduit à bloquer l_{sc}^s à sa plus faible valeur, la tension de ligne s'écrit alors :

$$\tau_{LT}^s = \mu b \left(\frac{1}{L^s} - \frac{1}{2\alpha R^s + l_c} \right) \quad (9)$$

Les paramètres de la loi de plasticité cristalline dépendant du matériau sont reportés dans le

E (GPa)	ν	b (nm)	H (s ⁻¹)	ΔG_0 (eV)	τ_0 (MPa)	ρ_{ini}^s (mm ⁻²)
225.91-44*T	0.29	0.248	$1.5 \cdot 10^{11}$	0.84	363	10^6
l_c (nm)	τ_F (MPa)	g_c (nm)	a^{su}	α_{auto}	α	K
4.96	10	4	0.1225	0.25	0.35	10

Tableau 1.

E (GPa)	ν	b (nm)	H (s ⁻¹)	ΔG_0 (eV)	τ_0 (MPa)	ρ_{ini}^s (mm ⁻²)
225.91-44*T	0.29	0.248	$1.5 \cdot 10^{11}$	0.84	363	10^6
l_c (nm)	τ_F (MPa)	g_c (nm)	a^{su}	α_{auto}	α	K
4.96	10	4	0.1225	0.25	0.35	10

Tableau 1 : Valeurs des paramètres dépendant du matériau.

On remarque que l'élasticité du matériau est supposée isotrope par simplicité. Le module de cisaillement vaut

alors $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$.

3 Implantation numérique

La loi de plasticité cristalline présentée dans la section précédente est introduite dans le code de calcul aux éléments finis CAST3M (<http://www-cast3m.cea.fr/>). La résolution numérique des équations différentielles est réalisée à l'aide d'une procédure Runge-Kutta d'intégration explicite à pas de temps adaptatif en fonction d'un critère d'erreur [7].

Pour pouvoir prendre en compte les rotations du réseau cristallin au cours de la déformation plastique, les relations de comportement sont au préalable introduites dans un cadre de grandes transformations [8]. On utilise la décomposition classique [9] du gradient de la transformation $\underline{\underline{F}}$ en sa partie plastique $\underline{\underline{F}}^p$ et élastique $\underline{\underline{F}}^e$.

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{F}}^p \quad (10)$$

Dans ce cadre, la cission résolue sur chaque système de glissement s'écrit [8] :

$$\tau_{app}^s = \left(\underline{\underline{F}}^{eT} \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}}^e \right) : \underline{\underline{N}}^s \quad (11)$$

Avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur des modules, $\underline{\underline{E}}^e$ la déformation élastique de Green-Lagrange et $\underline{\underline{N}}^s$ le tenseur de Schmid défini par $\underline{\underline{N}}^s = \underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s$, avec $\underline{\underline{m}}^s$ la direction de glissement et $\underline{\underline{n}}^s$ la normale au plan de glissement.

A chaque pas de temps, le code de calcul fournit la nouvelle valeur de $\underline{\underline{F}}$ et connaissant $\underline{\underline{F}}^p$ stocké dans des variables internes, on peut ainsi de proche en proche intégrer le comportement du matériau. En post-traitement, il est également possible de connaître la part de rotation élastique comprise dans $\underline{\underline{F}}$ ou $\underline{\underline{F}}^e$, ce qui lors, d'un essai de traction revient à connaître la rotation du réseau cristallin. Pour ce faire, on utilise la décomposition $\underline{\underline{F}}^e = \underline{\underline{R}}\underline{\underline{U}}$ avec $\underline{\underline{R}}$ un tenseur orthogonal et $\underline{\underline{U}}$ un tenseur symétrique défini positif [10].

4 Premiers résultats de simulation

On simule pour différentes températures le comportement en traction d'une poutre monocristalline constituée de 2x2x30 éléments finis cubiques à interpolation linéaire du champ de déplacement (CUB8). On oriente le monocristal par rapport à l'axe de traction pour que la déformation ne se fasse initialement que selon un système de glissement. L'axe de traction est ainsi orienté selon la direction [-159] dans le repère cristallin.

Pour rendre compte de la rotation du réseau cristallin qui apparaît au cours d'un essai réel de traction sur monocristal après de grands niveaux de déformation, on impose que les faces extrêmes de la poutre restent parallèles et ne se déplacent que dans la direction de traction [11].

Le maillage utilisé ainsi qu'une déformée de l'éprouvette obtenue après 20% de déformation conventionnelle sont représentés sur la figure 1. Un exemple de champs de glissement plastique sur le système primaire et secondaire est également représenté sur cette figure ainsi que le champ de cission sur le système principal.

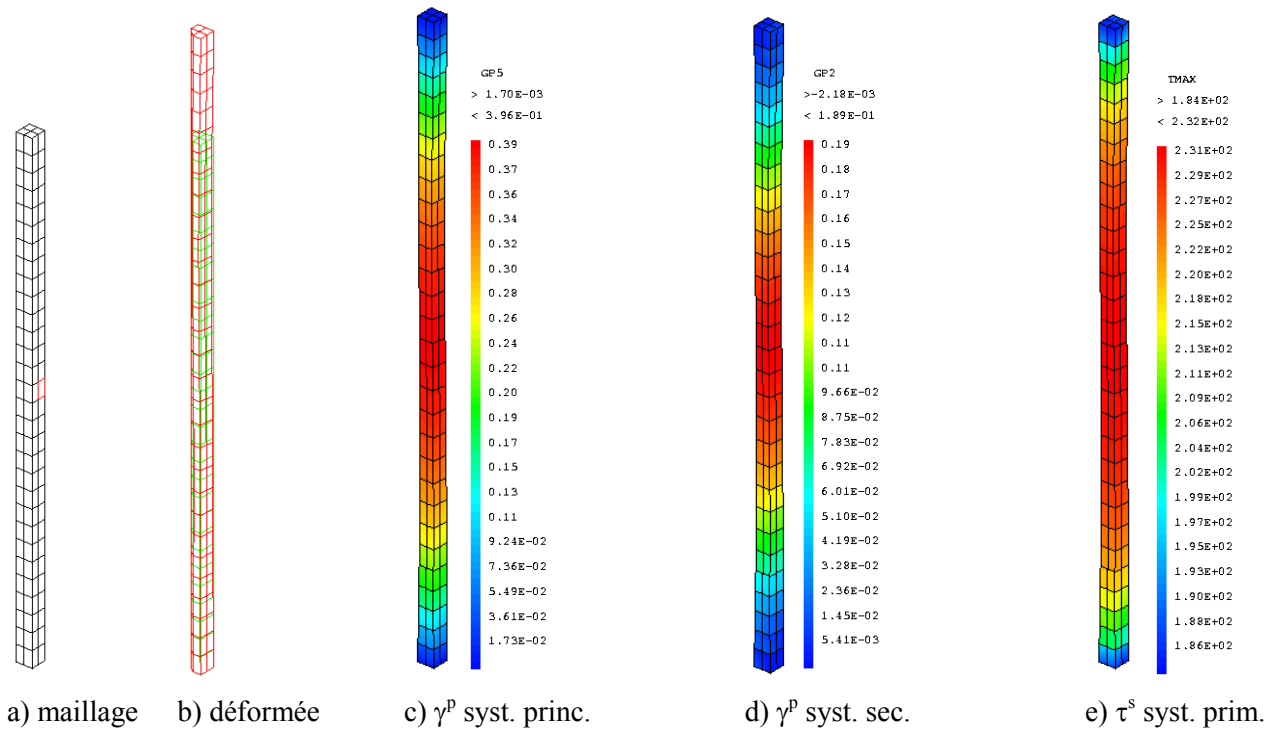
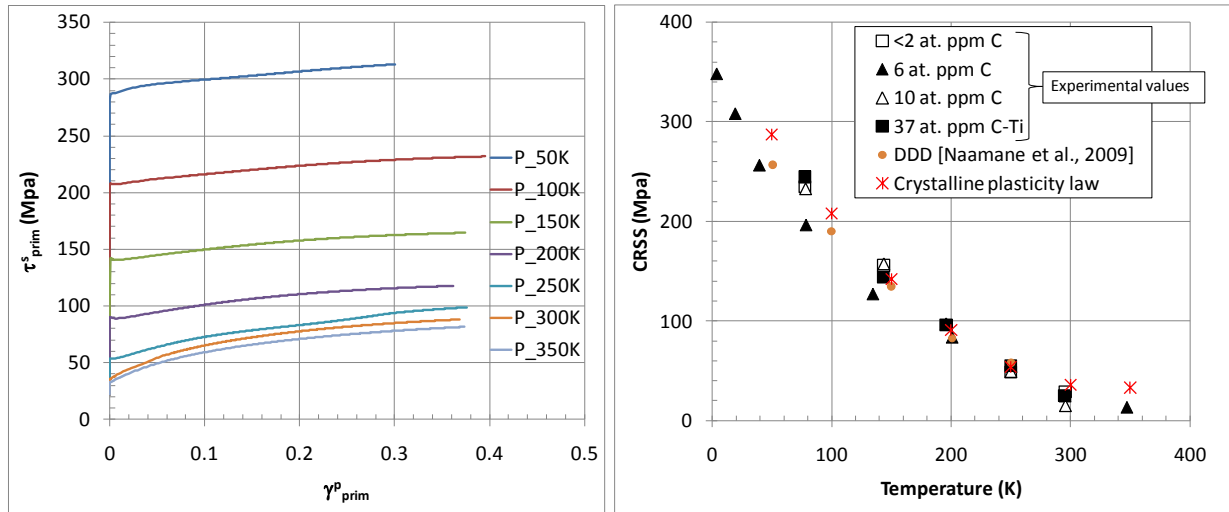


FIG. 1 : Maillage, déformée et champs de principales variables internes d'une poutre monocristalline après 20% de déformation conventionnelle de traction à $T=100K$.

Dans la suite, on représente l'évolution au cours de la déformation des principales variables enregistrées dans un élément fini situé au centre de la poutre (représenté en rouge sur la première image de la figure 1), et ce pour différentes valeurs de température. Le comportement sur le système primaire est ainsi représenté sur la figure 2a) en fonction de la température. Un point de comparaison intéressant par rapport à des résultats expérimentaux [12-15] et de simulations en DDD [1] est l'évolution de la cission critique lors de l'entrée en plasticité en fonction de la température. Cette comparaison est représentée sur la figure 2b) et l'on constate une bonne reproduction de cette évolution par la loi de plasticité cristalline. Cela n'est en soit pas trop surprenant dans la mesure où la loi d'écoulement (4) s'inspire fortement de la loi de mobilité introduite dans les simulations de DDD [1]. Concernant l'écrouissage, on peut constater sur la figure 2a) que celui-ci augmente avec la température (surtout en relatif par rapport à la cission critique), ce qui est en accord avec des résultats expérimentaux de [14].

L'évolution de la longueur de segment vis et de la tension de ligne du système primaire sont représentés sur la figure 3. On peut remarquer que la longueur de segment vis est bien une fonction décroissante de la température et de la déformation plastique. Tant que la longueur de segment vis reste supérieure à sa longueur critique l_c , la tension de ligne reste nulle, ce qui est observé pour toutes les simulations réalisées à une température inférieure à 250K et quel que soit le niveau de déformation.



a) comportement sur le système primaire b) Evolution de la cisssion critique en fonction de la température

FIG. 2 : Comportement du système principal. Comparaison avec des résultats de DDD [1].

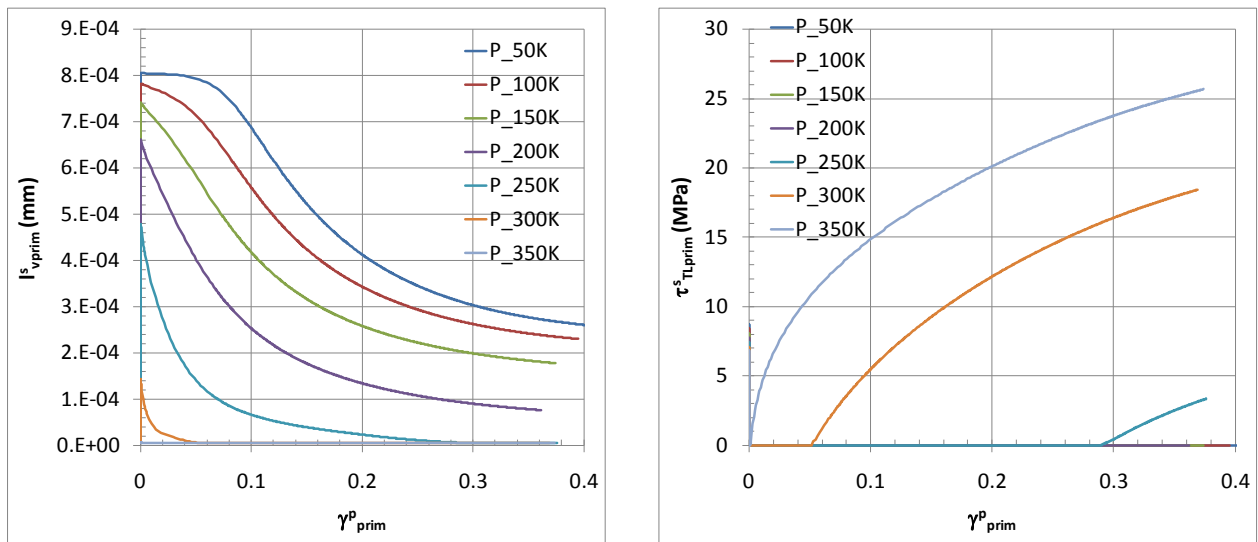


FIG. 3 : Evolution de la longueur de segment vis a) et de la tension de ligne b)

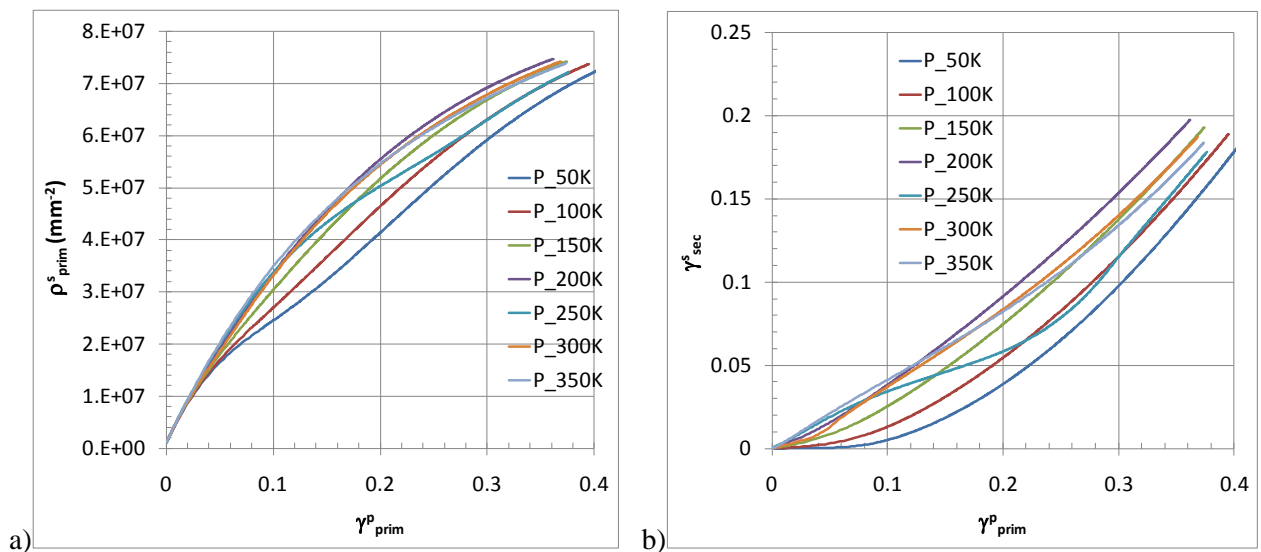


FIG. 4 : a) Evolution de la densité de dislocation sur le système primaire et b) évolution du glissement plastique sur le système secondaire en fonction du glissement sur le système primaire.

A partir de 250K, la longueur de segment vis décroît suffisamment pour atteindre sa valeur minimale, ce qui permet à la tension de ligne d'augmenter en fonction de la déformation plastique. Enfin à 350K, on constate que la longueur de segment vis est dès le début de la simulation bloquée à sa valeur minimale.

On peut constater sur la figure 4 que l'évolution de la densité de dislocations sur le système primaire et l'activité plastique du système secondaire en fonction de celle du système primaire sont assez peu sensibles à la température simulée.

Enfin, on peut représenter sur la figure 5b) l'évolution de la direction de l'axe de traction dans le triangle standard au cours de la simulation, ce qui permet d'évaluer la rotation du réseau cristallin. Du fait de cette rotation, l'augmentation de contrainte axiale macroscopique est plus importante que celle calculée sur le système primaire (figure 5a).

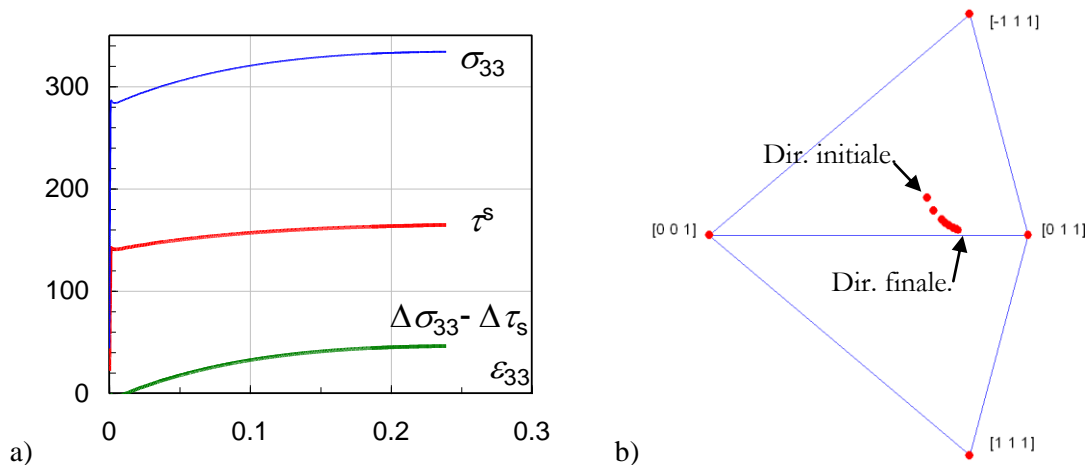


FIG. 5 : a) Contrainte axiale et résolue sur le système principale et b) évolution de la direction de traction dans le triangle standard, à T=150K.

5 Conclusion

Une loi de plasticité cristalline est proposée pour le régime basse température des matériaux cubique centrée en partant de l'analyse de résultats obtenus en Dynamique des Dislocations. Un premier exemple de simulation sur une poutre monocristalline permet d'évaluer la capacité de cette loi à reproduire certains résultats expérimentaux ou de simulation en DDD.

Références

- [1] S. Naamane, G. Monnet, B. Devincere, Low temperature deformation in iron studied with dislocation dynamics simulations, *International Journal of Plasticity*, 26 (2010) 84-92.
- [2] G. Monnet, S. Naamane, B. Devincere, Orowan Strengthening at low temperatures in bcc materials studied by dislocation dynamics simulations, *Acta Materialia*, 59 (2011) 451-461.
- [3] K. Obrtlik, C.F. Robertson, B. Marini, Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension, *Journal of Nuclear Materials*, 342 (2005) 35-41.
- [4] F. Louchet, L.P. Kubin, D. Vesely, In situ Deformation of Bcc Crystals at Low-Temperatures in a High-Voltage Electron-Microscope Dislocation Mechanisms and Strain-Rate Equation, *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 39 (1979) 433-454.
- [5] M. Tang, B. Devincere, L.P. Kubin, Simulation and modelling of forest hardening in body centre cubic crystals at low temperature, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 7 (1999) 893-908.
- [6] Y. Estrin, H. Mecking, A unified phenomenological description of work-hardening and creep based on one-parameter models, *Acta Metallurgica*, 32 (1984) 57-70.
- [7] O. Fandeur, Procédure Runge-Kutta d'intégration explicite à pas de temps adaptatif pour lois de comportement en grandes transformations dans CAST3M, communication personnelle., in, 2010.
- [8] J. Besson, G. Cailletaud, J. Chaboche, S. Forest, *Mécanique non linéaire des matériaux*, Hermès, (2001).
- [9] J. Mandel, *Plasticité classique et viscoplasticité*, volume 97 of CISM Courses and lectures, in, Springer Verlag, 1971.
- [10] S. Forest, M. Amestoy, *Mécanique des Milieux Continus*, Cours de l'Ecole des Mines, in: L.P.d.l.E.d. Mines

(Ed.), 2008.

[11] M. Fivel, S. Forest, Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal, doc M4-016, in: L.T.d. l'Ingénieur (Ed.).

[12] D.J. Quesnel, A. Sato, M. Meshii, Solution Softening and Hardening in Iron-Carbon System, Mater Sci Eng, 18 (1975) 199-208.

[13] W.A. Spitzig, Effects of Orientation, Temperature and Strain Rate on Deformation of Fe-0.16 Wt Percent Ti Single-Crystals, Mater Sci Eng, 12 (1973) 191-202.

[14] E. Kuramoto, Y. Aono, K. Kitajima, Thermally Activated Slip Deformation of High-Purity Iron Single-Crystals between 4.2-K and 300-K, Scripta Metall Mater, 13 (1979) 1039-1042.

[15] W.A. Spitzig, A.S. Keh, Effect of Orientation and Temperature on Plastic Flow Properties of Iron Single Crystals, Acta Metallurgica, 18 (1970) 611-622.